Agilent ChemStation

新しい ChemStation ワークフロー入門

Agilent Technologies

注意

© Agilent Technologies, Inc. 2006, 2007-2010

本マニュアルは米国著作権法および国際著作権法によって保護されており、Agilent Technologies, Inc. の書面による事前の許可なく、本書の一部または全部を複製することはいかなる形式や方法（電子媒体による保存や読み出し、外国語への翻訳なども含む）においても、禁止されています。

マニュアル番号

G2170-96044

エディション

2/2010

Printed in Germany

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

ソフトウェア リビジョン

このガイドは、Agilent ChemStation ソフトウェアのリビジョン B.04.02 SP1 以降のバージョンに対して有効です。

Microsoft は、Microsoft Corporation の米国の登録商標です。

保証

このマニュアルに含まれる内容は「現状のまま」提供されるもので、将来のエディションにおいて予告なく変更されることがあります。また、Agilent は、適用される法律によって最大限に許可される範囲において、このマニュアルおよびそれに含まれる情報に関して、商品性および特定の目的に対する適合性の暗黙の保証を含みそれに限定されないすべての保証を明示的か暗黙的かを問わず一切いたしません。Agilent は、このマニュアルまたはそれに含まれる情報の所有、使用、または実行に付随する過誤、または偶然的または間接的な損害に対する責任を一切負わないものとします。Agilent とお客様の間に書面による別の契約があり、このマニュアルの内容に対する保証条項がこの文書の条項と矛盾する場合は、別の契約の保証条項が適用されます。

技術ライセンス

このマニュアルで説明されているハードウェアおよびソフトウェアはライセンスに基づいて提供され、そのライセンスの条項に従って使用またはコピーできます。

安全に関する注意

注 意

注意は、危険を表します。これは、正しく実行しなかったり、指示を順守しないと、製品の損害または重要なデータの損失にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起します。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、**注意**を無視して先に進んではなりません。

警 告

警告は、危険を表します。これは、正しく実行しなかったり、指示を順守しないと、人身への傷害または死亡にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起します。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、警告を無視して先に進んではなりません。

研究目的のみ。

本書の内容

分析ラボでは、短時間で効率的にクロマトグラフデータを取り込む必要があります。不明瞭な結果を具体的に把握するには時間がかかる可能性があり、管理費が高くなることがあります。ChemStation のリビジョン B.02.01 以降、結果データを素早く確認し再解析できるように、データ保存およびデータ参照の機能が改善されてきました。

このマニュアルでは、ラボの生産性を高めるための ChemStation リビジョン B.04.02 SP1 の新しいデータ保存および検索機能の効率的な使用法を説明します。

1 ChemStation データ構造

この章では、ChemStation リビジョン B.02.01 より前に使用されていたデータ構造とリビジョン B.02.01 以降の新しいデータ構造の違いの概要を説明します。

2 データ取り込み

この章では、新しいデータ構造がシーケンスやシングルランのデータを取り込むワークフローにどのように影響を及ぼすかを説明します。

3 データ解析

この章では、データ解析と使用可能なレビューオプションの概要を説明し、データ構造がオプションの選択にどのような影響を及ぼすかを説明します。

4 [ユニークなフォルダ作成オフ] のワークフロー

この章では、ChemStation B.01.03 以前のリビジョンようにデータを保存する [ユニークなフォルダ作成オフ] の操作に関する情報を提供します。このモードでは、ChemStation の新しいデータレビューや再解析機能を十分に活用することはできません。

目次

1 ChemStation データ構造 5

B.02.01 より前の ChemStation 6
ChemStation B.02.01 以降 7

2 データ取り込み 11

データ取り込み 12

3 データ解析 19

データ解析 20
データ解析：データレビュー 23
データレビュー時の ChemStation ユーザーインタフ ェース 30
データ解析：データの再解析 33

4 [ユニークなフォルダ作成オフ] のワークフロー 37

ユニークなフォルダ作成のオン / オフどちらを選択 するか 38
[ユニークなフォルダ作成オフ] のワークフロー 40
シーケンスコンテナマイグレーション 44

1 ChemStation データ構造

B.02.01 より前の ChemStation 6
ChemStation B.02.01 以降 7

この章では、ChemStation リビジョン B.02.01 より前に使用されていたデータ構造とリビジョン B.02.01 以降の新しいデータ構造の違いの概要を説明します。

B.02.01 より前の ChemStation

ChemStation リビジョン B.02.01 より前は、シーケンス、メソッド、作成したデータファイルと結果は、指定による固定された別々の場所に保存されていました。たとえば、メソッドはシーケンス内で名前で参照され、メソッド、シーケンス、データファイルの一貫性を維持するのはユーザーの責任でした。このため、データの長期アーカイブと結果の複製は面倒な仕事でした。規制対象ラボだけでなく、非規制対象ラボ（環境分析ラボなど）の一部においても、ユーザーがクロマトグラム、結果、関連メソッドを文書に記録する必要がありました。ChemStation リビジョン B.02.01 より前は、この目的を達成するには、すべてをレポートに印刷するしかありませんでした。

ChemStation B.02.01 以降

データファイルとメソッドの関連性を強めるため、ChemStation B.02.01 以降では以下の新しいデータ編成の仕組みが実装されました。ChemStation とともに使用される Agilent OpenLAB Enterprise Content Manager (ECM) でも新しいデータ概念を取り入れています。これは、完全なデータセット（シーケンス / メソッド / データファイル）を 一塊にして、ECM へ転送（アーカイブ）できるようになったためです。

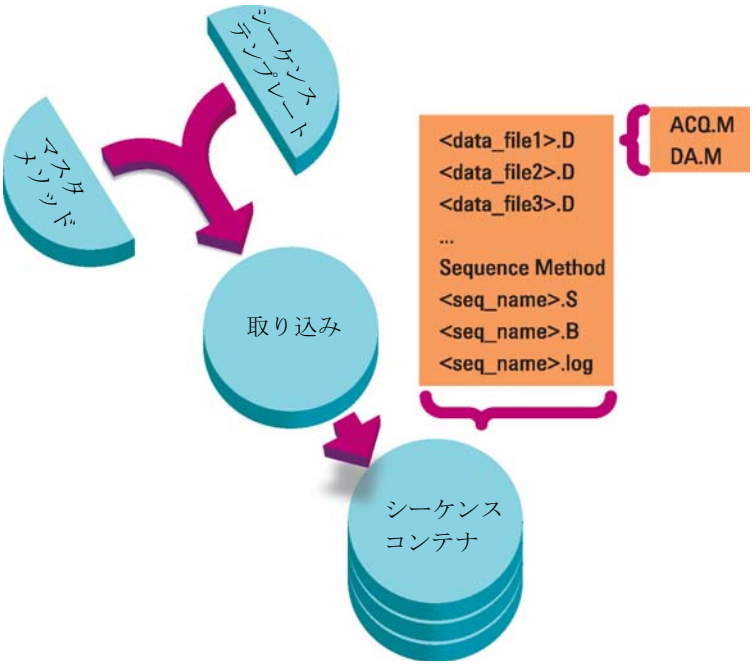

図 1　　シーケンス取り込み B.02.01 以降

フォルダ Chem32¥1¥methods にあるメソッドはマスターメソッドの役割を果たします。つまり、これらのメソッドは取り込みとデータ解析中に変更されません。

同様に、フォルダ Chem32¥1¥sequence にあるシーケンスは、複数回シーケンスを再実行（再解析ではない）するのに使用できるシーケンステンプレートの役割を果たします。

データ保存パターンは、シングルランデータが取り込まれるか、シーケンスデータが取り込まれるかによって変化します。

1 シーケンスが実行される際、一意の名前を持つ新しいフォルダ（**シーケンスコンテナ**）が指定されたサブディレクトリに自動的に作成されます。単一のサンプルが分析される場合、データファイル（*.d）は指定されたサブディレクトリに書き込まれます。

2 シーケンスデータでは、実行したシーケンステンプレート（*.s）と関連するすべてのメソッド（*.m）がシーケンスコンテナにコピーされます。メソッドのコピーは、元のマスターメソッドと区別するために**シーケンスメソッド**と呼ばれます。

   すべてのシーケンス関連タスク（取り込みとデータ解析）は、シーケンスとメソッドのコピーに対して実行されます。そのため、シーケンステンプレートとマスターメソッドは次のシーケンスを実行しても変更されません。

   シーケンステーブルへの行の追加など、取り込み中のシーケンスへのすべての変更は、シーケンスコンテナ内のシーケンスファイルのコピーに対して行われます。シーケンステンプレートは変更されません。

   同様に、メソッドに変更がある場合（つまり、キャリブレーション分析でキャリブレーションテーブルが更新される場合）は、シーケンスメソッドには反映されますが、マスターメソッドには反映されません。

   シーケンス実行中、作成されるデータファイル（*.d）は、それに対応するバッチファイル（*.b）とシーケンスログファイル（*.log）とともに、すべてシーケンスデータフォルダに保存されます。

3 各データファイルには、分析を作成するために使用されるメソッドのコピーが 2 つ含まれます。

   - 1 番目のコピーは ACQ.M と呼ばれ、メソッドの取り込み部分が完了した後に直接保存されます。
   - DA.M と呼ばれる 2 番目のコピーは、データ解析部分の完了後に保存されます。

     これら両方のメソッドには、取り込みパラメータとデータ解析パラメータなどのすべてのメソッドパラメータが含まれます。

ACQ.M は、特定のデータファイルごとのオリジナルのメソッドパラメータの保護を行うためのものです。取り込みパラメータは、[データ解析] ビューで表示および印刷できます。

シーケンスのすべての分析には適用されませんが、タイム積分イベントなどの特定のデータファイルに対して固有のデータ解析パラメータを保存するために、DA.M をデータの解析中に変更できます。

以下の章では、この構造が一般的なワークフローに及ぼす影響を詳細に説明します。ChemStation のダイアログにおいて、これに対応する設定値も示します。

1 ChemStation データ構造

ChemStation B.02.01 以降

2 データ取り込み

データ取り込み 12
シーケンスのデータ取り込み 13
シーケンスの選択分析による取り込み 15
シングルランのデータ取り込み 17

この章では、新しいデータ構造がシーケンスやシングルランのデータを取り込むワークフローにどのように影響を及ぼすかを説明します。

データ取り込み

ChemStation B.02.01 以降からは、シングルランやシーケンスデータの保存場所を、再コンフィグレーションすることなく柔軟に指定できるようになりました。[**表示**] メニューの [**プレファレンス**] ダイアログボックスにある [**パス**] タブから、デフォルトパス C:¥chem32¥x¥DATA（x は機器番号）以外のパスを複数、追加することができます。[**追加**] や [**消去**] ボタンを使用して、既存のパスを簡単に消去したり、パスを選択して、新しい保存場所のパスを [**プレファレンス**] に追加したりできます。デフォルトパスはこのリストからは削除できませんが、[**コンフィグレーションエディタ**] から変更することができます。

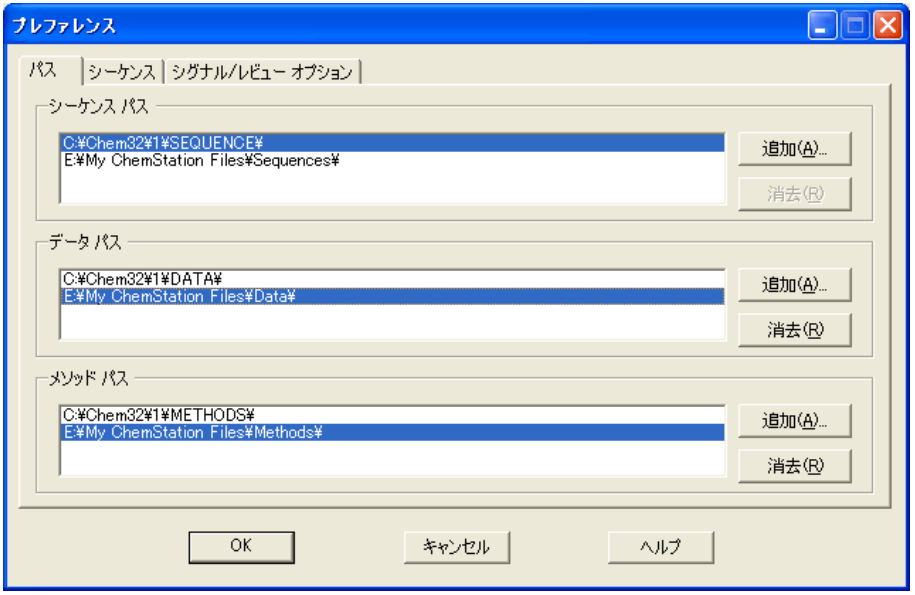

図 2　　[プレファレンス] ダイアログの [パス] タブ

新たに指定したすべてのデータパスは、分析を実行する際に [**サンプル情報**] や [**シーケンスパラメータ**] ダイアログボックスで選択可能になります。

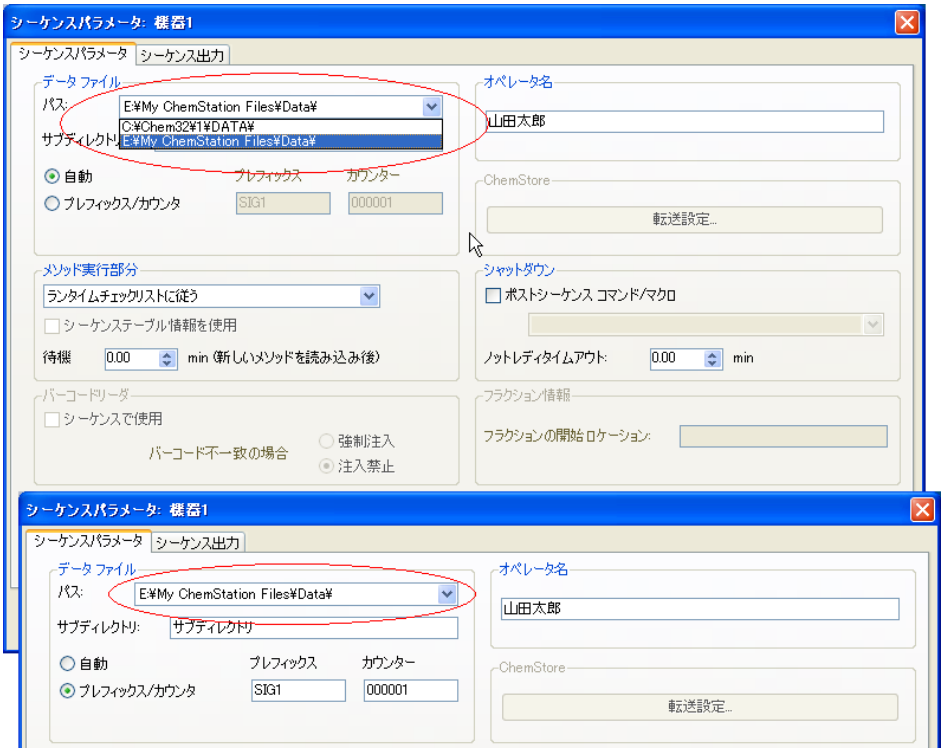

図 3　　データパス選択

シーケンスのデータ取り込み

シーケンスの実行には、適切に設定されたメソッドが必要です。そのようなメソッドとして前章で紹介したマスターメソッドを使用します。通常、マスターメソッドとシーケンステンプレートは、ChemStation の［**メソッド & ランコントロール**］ビューから操作します。そのため、マスターメソッドとシーケンステンプレートは［**メソッド & ランコントロール**］ビューの ChemStation エクスプローラからアクセスできるようになっています。

シーケンステンプレートは、シーケンステーブルにあるマスターメソッドを参照します。

すでに説明したように、マスターメソッド〈method_name〉.M を使用するシーケンステンプレート〈sequence_name〉.S を使ってシーケンスが実行された場合、新しいフォルダ（シーケンスコンテナ）が作成され、シーケンスランから生じるすべてのファイルがそこに保存されます。

このフォルダの場所は、[**シーケンスパラメータ**] ダイアログボックスの設定により指定され、フォルダ名は [**プレファレンス**] ダイアログボックスの [**シーケンス**] タブにより決まります。デフォルトのフォルダ名は、[シーケンス名][日付][時間] ですが、[オペレータ名]、[機器名]、[カウンター]、[コンピュータ名] などを使用して設定するか、任意の名前を手動で入力することができます。[**名前のパターン**] がシーケンスコンテナに対して一意の名前にならない場合、ChemStation はカウンターを付けて一意の名前が作成されるようにします。

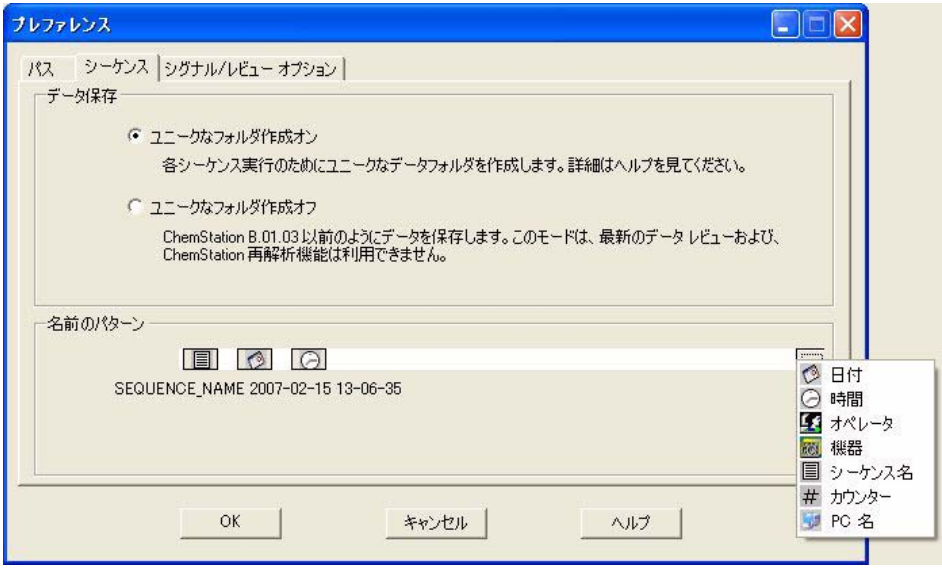

図 4　　[プレファレンス] ダイアログの [シーケンス] タブ

シーケンスの取り込み開始時に、シーケンステーブルで指定されたメソッドがマスターメソッドフォルダからシーケンスコンテナにコピーされます。また、シーケンスのコピーが作成され、シーケンスログ、バッチ (*.b) ファイルとともにシーケンスコンテナに保存されます。すべてのメソッド更新（キャリブレーションテーブルの更新など）はコンテナ内のこのシーケンスメソッドに書き込まれます。このようにして、シーケンスランで使

用するため変更を適用されたマスターメソッドやシーケンステンプレートの影響を受けることなく、データレビューや再解析に必要なファイルがすべてコンテナ内に準備されます。

取り込んだデータファイルはシーケンスコンテナに保存されます。各データファイル (*.D) には、この分析 (ラン) に特定の ACQ.M と DA.M という 2 つのメソッドが追加で保存されます。これら 2 つのメソッドは、シーケンスメソッドのコピーで、特定のデータファイルの取り込み時のメソッド状態を保存します。キャリブレーションテーブルの更新などがある場合、DA.M メソッドは、分析 (ラン) ごとに異なります。

各データの取り込みメソッド ACQ.M は取り込みパラメータを保存するためのものなので、将来データをレビューする際にもこのメソッドは変更しないことを推奨します。[**データ解析**] ビューで、ACQ.M メソッドの取り込みパラメータを表示および印刷できます。

マスターメソッドまたはシーケンステンプレートを変更せずに、シーケンスコンテナに保存されたこれらのファイルを使用してすべてのデータレビューと再解析作業を実行できます。必要に応じて、メソッドの変更をマスターメソッドに保存することもできます。

シーケンスの選択分析による取り込み

シーケンスの選択分析による取り込みの場合、ユーザーは以下の 2 つからデータの保存方法を選択します。

- 新しいシーケンスコンテナにシーケンスの選択分析データを取り込む

または

- 既存のシーケンスコンテナにシーケンスの選択分析データを取り込む

既存のシーケンスコンテナにデータファイルを取り込む設定でシーケンスの選択分析を実行すると、以下のようなケースで役に立つ場合があります。

- 例えば、間違ったバイアルを使用したため、単一 (または複数) のデータファイルを上書きする必要がある場合。
- シーケンスの最初の部分のみが実行されており、シーケンスの選択分析を実行して不足しているサンプルを追加する必要がある場合。以上のようなケースは、シーケンス取り込み中に発生した障害などにより生じる可能性があります。

- 既存のラインをすべて取り込んだ後に、シーケンステンプレートにラインを追加した場合。追加の分析を、既存データに追加されるようにしたい場合。

ユーザーが［ **シーケンス** ］メニューから［ **シーケンスの選択分析** ］を選択すると、ダイアログボックスが表示され、既存のシーケンスコンテナを選択するリストと、新しいシーケンスコンテナを作成するオプションが提供されます。

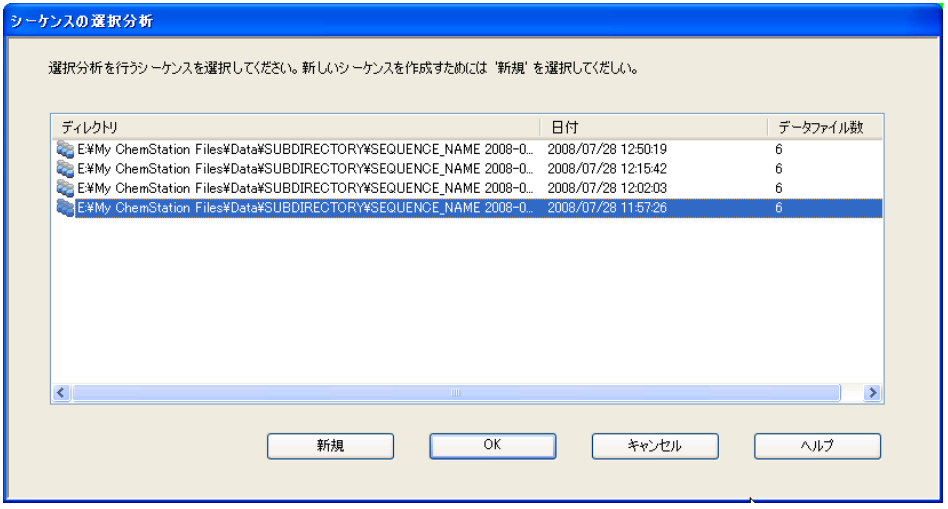

図 5　　［ シーケンスの選択分析 ］ダイアログ

ただし、（［ **データ解析** ］で完全に再解析できるように）シーケンスコンテナの一貫性を保つため、以下の特定の条件を満たすシーケンスコンテナのみが選択分析の取り込み用にリストされます。

- シーケンステンプレート（元のシーケンス）の名前と、シーケンスコンテナ内のシーケンス .S ファイル（ターゲットシーケンス）の名前が同一であること。
- 上記のシーケンスファイルに関して、データパスとサブディレクトリの両方が同一であること。
- 元のシーケンスのシーケンスライン数が、ターゲットシーケンスのシーケンスライン数以上であること。
- ターゲットシーケンスの各ラインにあるサンプルタイプと注入回数が、元のシーケンスの対応するラインの値と同一であること。

- 2 つのシーケンスファイルにおけるデータファイルの命名規則が同一であること。

[OK]（リストから既存のシーケンスコンテナの 1 つを選択する場合）または [**新規**]（新規シーケンスコンテナを作成する場合）をクリックしてこのダイアログを閉じ、シーケンスの選択分析で実行するシーケンスラインを選択します。

シングルランのデータ取り込み

新しいデータの概念は、シングルランにも導入されます。この場合、データファイルはそれぞれのサブディレクトリに直接保存されます。シングルランでは、メソッドが 1 つだけ使用されるので、このメソッドをサブディレクトリにコピーする必要はなく、すべてのアクションはマスターメソッドを使用して直接行われます。メソッドの取り込み部分が完了すると、マスターメソッドのコピーがデータファイルディレクトリ（ACQ.M）に保存されます。メソッドのデータ解析部分が実行されると、もう 1 つのコピー（DA.M）が保存されます。

2 データ取り込み

データ取り込み

3 データ解析

データ解析 20
データ解析： データレビュー 23
データレビュー時の ChemStation ユーザーインタフ ェース 30
データ解析： データの再解析 33

この章では、データ解析と使用可能なレビューオプションの概要を説明し、データ構造がオプションの選択にどのような影響を及ぼすかを説明します。

データ解析

取り込んだデータは、ChemStation の [**データ解析**] ビューで解析します。ChemStation エクスプローラの [**データ**] タブを選択している場合、該当するマークをダブルクリックすることにより、特定フォルダ内のすべてのシーケンスランまたはすべてのシングルランを読み込むことができます。その後、該当するデータセットは [ナビゲーションテーブル] から利用できるようになります。

図 6　ChemStation エクスプローラからナビゲーションテーブルへのシーケンスの読み込み

[ナビゲーションテーブル] はそのセットにあるすべての分析のリストです。[**ファイル**] > [**シグナル読み込み**] メニューから分析データを読み込む代わりに、[ナビゲーションテーブル] の該当行をダブルクリックすることにより ChemStation メモリに分析データを読み込めます。さらに、分析データを右クリックすると、特定シグナルの読み込み、重ね書き、データのエクスポート、取り込みメソッドパラメータの表示などさまざまなオプションが提供されます。

分析データが読み込まれると、データ解析パラメータの調整、シグナルの積分やレポートの印刷などのレビューが可能になります。この場合、シーケンス全体については考慮しないか、シーケンステーブルの機能を使用せずに、シングルランとして分析データを解析しています。このようなデー

タ解析方法を、[**データレビュー**] と呼びます。[ナビゲーションテーブル] にはデータレビューをより便利にする『21 ページ 図 7』に示されるツールセットがあります。

図 7　　[ナビゲーションテーブル] のデータレビューツールセット

このツールセットを使用して、[ナビゲーションテーブル] の最初や最後にジャンプしたり、次の分析 / 前の分析に進んだり、分析全体のオートステップの開始、停止などを行えます。

データを解析するもう 1 つの方法に、シーケンス全体の [**再解析**] があります。再解析では、すべての分析がシーケンスで指定されているとおりに再解析されます。つまり、シーケンスメソッドのキャリブレーションテーブルがキャリブレーション分析で更新され、シーケンステーブルの倍率、アマウントなどが適用され、新しいメソッドがシーケンスコンテナに追加されます。[ナビゲーションテーブル] には再解析で使用する、以下のツールセットがあります。

図 8　　ナビゲーションテーブルのシーケンス再解析ツールセット

[ナビゲーションテーブル] の再解析アイコンは ChemStation B.02.01 以降で作成されたシーケンスデータでのみ使用できます。シングルランデータ、B.02.01 以前で作成されたデータ、[**ユニークなフォルダ作成オフ**] (『「[ユニークなフォルダ作成オフ] のワークフロー」40 ページ 図』を参照) で取り込まれたデータについては、[**データ解析**] でシーケンス再解析はできません。そのようなシーケンスは、シーケンスパラメータの [**メソッド実行部分**] を [**データ再解析のみ**] に設定し、[**メソッド & ランコントロール**] から再解析する必要があります。ChemStation B.02.01 以降で作成されたシーケンスでは、[**メソッド & ランコントロール**] の再解析オプションは削除され (『22 ページ 図 9』を参照)、再解析は [ナビゲーションテーブル] の [**データ解析タスク**] として提供されます。

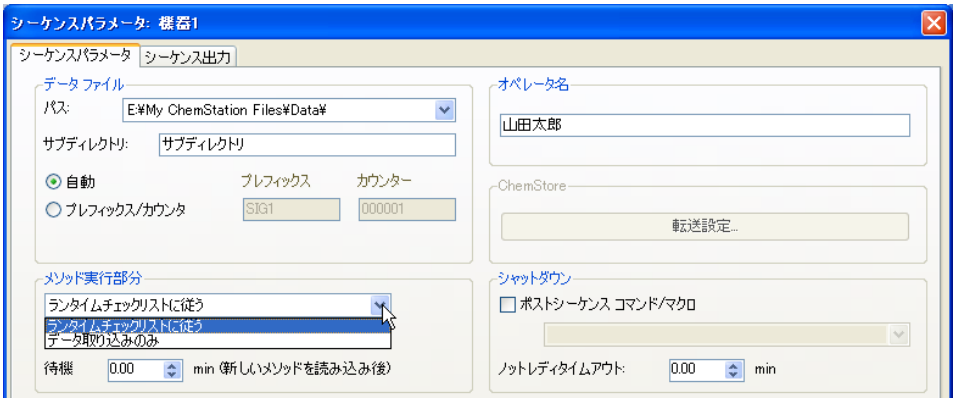

図 9　ChemStation B.02.01 以降の［メソッド & ランコントロール］のシーケンスパラメータ

データ解析： データレビュー

データレビューは分析データごとの解析を意味します。ChemStation では、データファイルが［ナビゲーションテーブル］から読み込まれる時に自動的に実行されるデフォルトのアクションを指定することができます。デフォルトアクションには、読み込み後にクロマトグラムを積分するようなデータ解析タスクや、読み込まれるメソッドを指定することができます。

レビュー時に適用するオプション（再解析には使用されません）は、［**プレファレンス**］ダイアログボックスの［**シグナル / レビューオプション**］タブで設定します。

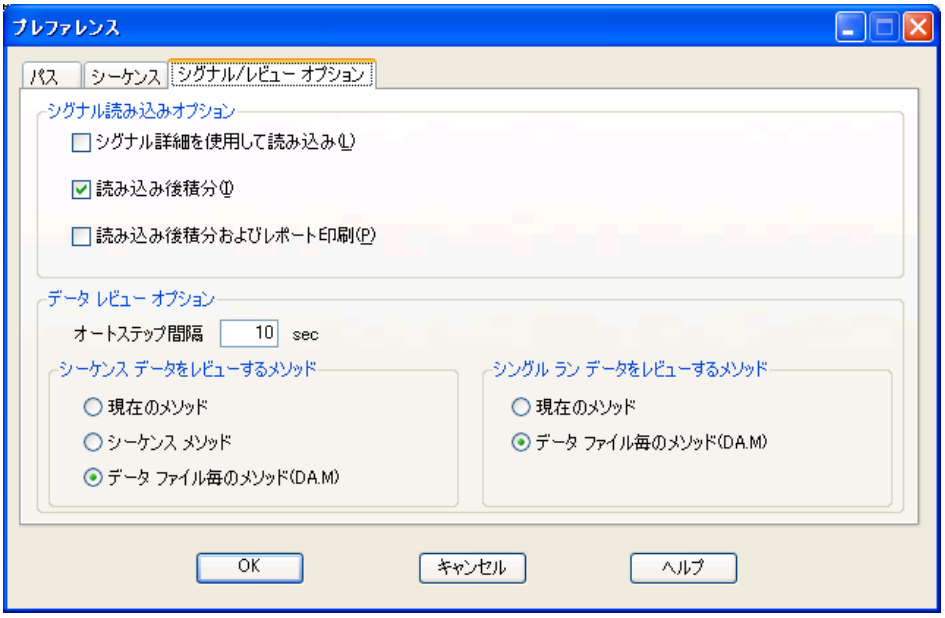

図 10　［プレファレンス］ダイアログの［シグナル / レビューオプション］タブ

最初の［**シグナル読み込みオプション**］セクションでは、分析データのどのシグナルを読み込むか、クロマトグラムを積分するか、読み込み後すぐに結果を印刷するかを指定します。

次の [**データレビューオプション**] セクションでは、[ナビゲーションテーブル] 内の分析データのオートステップ間隔を設定します。

また、このセクションの残りの部分では、分析データを [ナビゲーションテーブル] から読み込む際、データレビュー用に読み込むメソッドを指定します。これらの設定はデータレビューにのみ適用され、再解析には適用されません。以下のオプションセットはシーケンスランとシングルランにそれぞれ設定できます。

表 1　シーケンスとシングルランデータのデータレビューオプション

シーケンスデータをレビューするメソッド	シングルランデータをレビューするメソッド
現在のメソッド	**現在のメソッド**
シーケンスメソッド	**データファイル毎のメソッド (DA.M)**
データファイル毎のメソッド (DA.M)	

注記

[**プレファレンス**] ダイアログの [**シグナル / レビューオプション**] タブのオプションは、[**ナビゲーションテーブル**] からデータファイルを読み込んだ場合にのみ適用されます。[**ファイル**] の [**シグナル読み込み**] メニュー、またはメインツールバーの該当アイコンを使用した場合は、設定が適用されずメソッドが読み込まれないなどの結果につながります。

「現在のメソッド」を保持

現在読み込まれているメソッドを使用する場合、レビュー設定の [**現在のメソッド**] を必ず使用します。どのシングルランまたはシーケンスファイルが読み込まれているかに関係なく、現在のメソッドがデータレビュー用にロードされます。[**プレファレンス**] ダイアログで [**現在のメソッド**] を選択して、このオプションを有効にします（『25 ページ 図 11』を参照）。これにより、分析が読み込まれるごとに、同じメソッドがメモリ内に常駐するようになります。

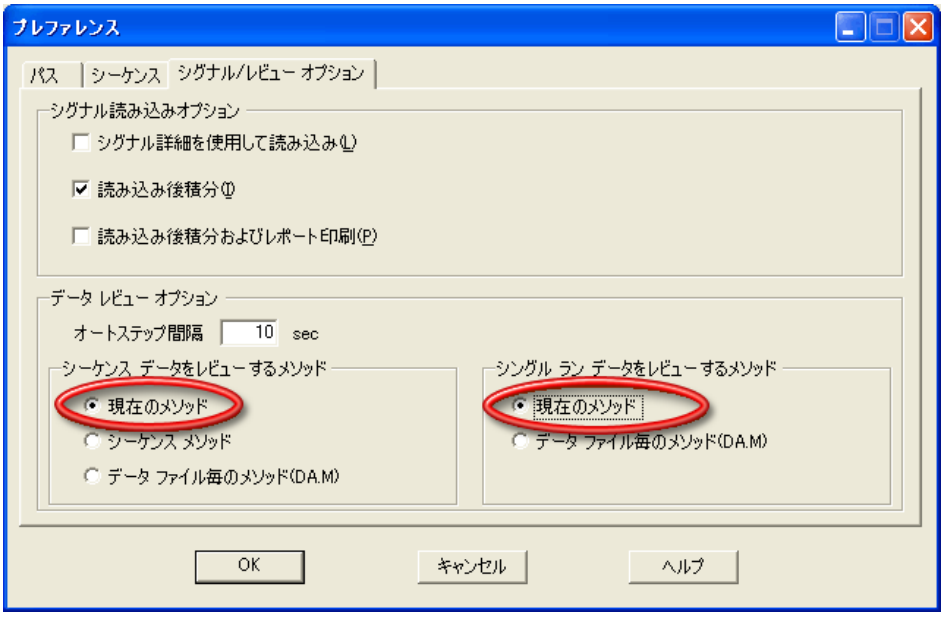

図 11　　データレビューのために現在のメソッドを保持

このオプションは、以下のようなワークフローに有効です。

- コンテナ内に存在しない、異なるメソッドを用いてシーケンスコンテナのデータファイルをレビューする場合。例えば、取り込みとデータ解析で別々のメソッドを使用するワークフローを採用しており、取り込みに使用されていないマスターメソッドを使用するなど。レビュー開始時に異なるマスターメソッドを読み込むには、ChemStation エクスプローラの［**メソッド**］タブから読み込むのが最も簡単な方法です。
- オンラインセッションで、データコンテナを取り込むために必要なマスターメソッドを編集する場合。機器パラメータとデータ解析パラメータの両方を、次回のシーケンスランの開始ポイントとして編集する場合。
- シーケンスコンテナ内の分析の 1 つに対して、個々のメソッドである DA.M のデータ解析パラメータを編集した場合。［**現在のメソッド**］オプションを使用して、DA.M のパラメータが他の分析データに対してもうまく適用できるかどうかを確認するために、このメソッドを用いてすべての分析をレビューすることができます。

「シーケンスメソッド」の読み込み

［シーケンスメソッド］オプションを使用してデータをレビューすると（『26 ページ 図 12』を参照）、［ナビゲーションテーブル］から分析を読み込むたびに、シーケンスラインで指定した分析のシーケンスメソッドが読み込まれます。このオプションは名前が示すとおり、シーケンスデータセットのレビューのみに使用でき、シングルランのレビューには使用できません。

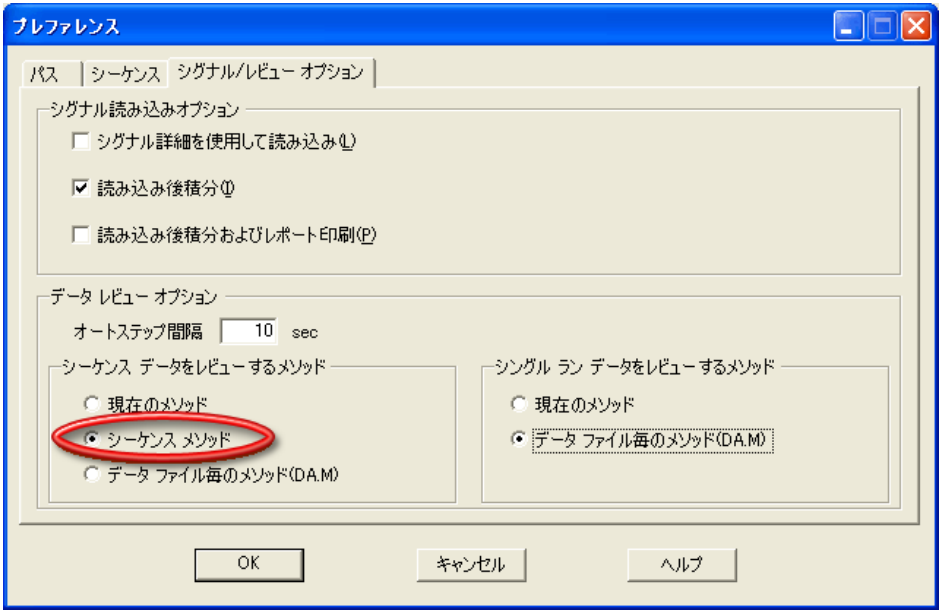

図 12　　データレビューのためにシーケンスメソッドの読み込み

このオプションは一般的にシーケンス特有のデータ解析パラメータの最適化に使用され、特に再解析の準備に用いられます（『「データ解析： データの再解析」33 ページ 図』を参照）。すべての分析をレビューし、シーケンスメソッドを最適化した後で、更新したメソッドを使用してシーケンス全体を再解析できます。

次回以降の取り込みのために、シーケンスメソッドの変更を対応するマスターメソッドに反映しなければならない場合があります。［マスターメソッドを更新］メニューを使用して、変更を容易に反映させることができます（『32 ページ 図　表 3』を参照）。

「データファイル毎のメソッド（DA.M）」の読み込み

個々の DA.M を対応するデータファイルと一緒に自動的に読み込む場合、レビュー設定の［**データファイル毎のメソッド（DA.M）**］（『27 ページ 図 13』を参照）を使用します。この場合、データファイルは［ナビゲーションテーブル］を使用して読み込みます。メソッドを変更した後、次の分析を読み込むと、新しいメソッド（次の分析の DA.M）が読み込まれるため、メソッドの変更を保存するか尋ねるダイアログが表示されます。

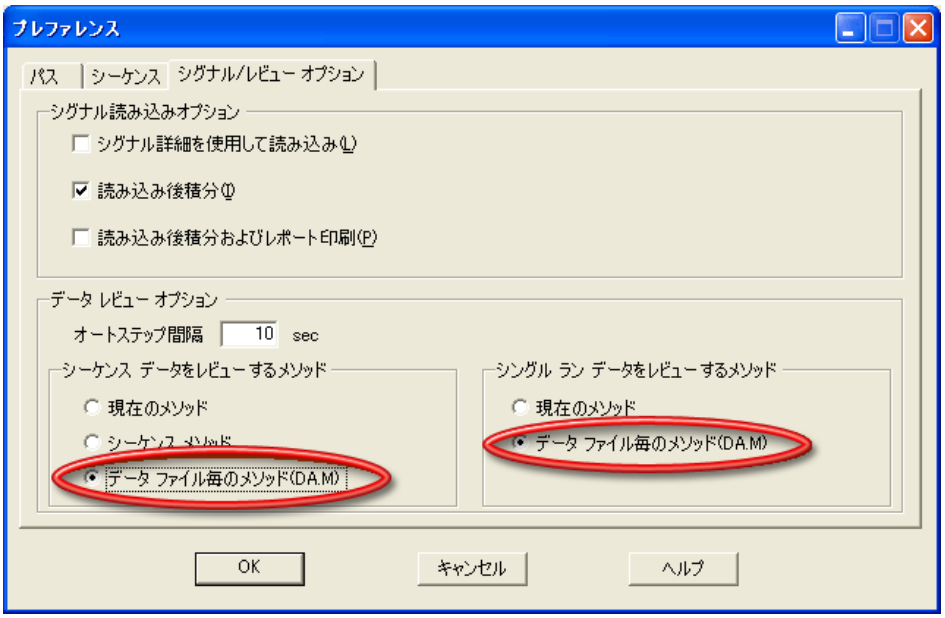

図 13　　データレビューのためのデータファイル毎のメソッドの読み込み

個別のデータ解析メソッド（DA.M）を用いると、分析データ毎に変更をして、個々のデータ解析メソッドにそれらを保存できます。シーケンス内の複数の分析が別々の積分タイムイベントを必要とする複雑なクロマトグラムを扱う場合に、このメソッドが役立つことがあります。

注記

シーケンスを再解析すると、すべてのアクションがシーケンスメソッドに対して実行されるため、各データファイルの DA.M が上書きされます（DA.M メソッドに保存したすべての変更が上書きされます）。DA.M の最適化は、再解析が完了した後で、最後のデータ解析手順として行う必要があります。

マニュアル積分イベントの処理

ベースラインを手動で設定した場合などのマニュアル積分イベントは、積分のタイムイベントよりもさらにデータファイルに固有のものです。複雑なクロマトグラムの場合、これらのマニュアルイベントを再解析に使用できることが非常に重要です。

そのため、ChemStation B.04.01 以降のリビジョンでは、メソッドではなくデータファイルに直接、マニュアル積分イベントを保存でるようになりました。データファイルをレビューまたは再解析する際には常に、データファイル中のマニュアル積分イベントが自動的に適用されます。マニュアル積分イベントが保存されている分析は、[ナビゲーションテーブル] の対応する列にマークが付けられます。

ベースラインのマニュアル設定やピーク削除ツールに加え、以下の 3 つのツールがユーザーインタフェースに追加されています。

- データファイルに、現在表示されているクロマトグラムのマニュアルイベントを保存
- 現在クロマトグラムに表示されている、すべてのイベントを削除
- 最後に実施したマニュアル積分イベントを元に戻す (イベントが保存されるまで使用可能)

[ナビゲーションテーブル] のレビュー中、次のデータファイルに切り替えるタイミングで ChemStation は未保存のマニュアル積分イベントを確認し、イベントを保存するかユーザーに尋ねます。

[ナビゲーションテーブル] のレビュー中にデータファイルに保存されたマニュアルイベントは、**[バッチ]** モードのレビュー中に保存されたマニュアル積分イベントとは結合されません。これら 2 つのレビュー方法は、データファイルのマニュアルイベントに関して完全に分離されています。

リビジョン B.04.01 より前の ChemStation では、マニュアル積分イベントはメソッドのみに保存されます。B.04.01 以降でもメソッドに保存するワークフローを使用することができます。メソッドでマニュアル積分イベントを処理するには、**[データ解析]** ビューの **[積分]** メニューから以下の項目を選択します。

[メソッドのマニュアルイベント アップデート]: 新しく追加されたマニュアルイベントをメソッドに保存します。

[メソッドからマニュアルイベント適用]: 現在メソッドに保存されているマニュアルイベントを現在読み込まれているデータファイルに適用します。

[**メソッドからマニュアルイベント削除**]: メソッドからマニュアルイベントを削除します。

メソッドからイベントを適用した後で、データファイルに結果を保存すると、メソッドに保存されたマニュアルイベントをデータファイルへの保存に変換することができます。必要に応じて、メソッドからイベントを削除します。

メソッドの [**積分イベントテーブル**] にある [**マニュアルイベント**] チェックボックスがオンの場合、このメソッドを用いるデータファイルが読み込まれるときは常に、メソッドのマニュアルイベントがデータに適用されます。データファイルにマニュアルイベントが保存されている場合は、データファイル内のイベントが使用されます。[**マニュアルイベント**] チェックボックスがオンの場合、データファイルにイベントを保存するかどうかユーザーが尋ねられることはありません。

データレビュー時の ChemStation ユーザーインタフェース

ChemStation ユーザーインタフェースでは、データ解析で使用できるさまざまなメソッドを利用しやすいように、多くの機能を提供しています（『30 ページ 図 14』）。

図 14　データ解析のユーザーインタフェース

- [**データ解析**] ビューにはメソッド更新状況が表示され、保存されていないメソッド変更があるかどうかをすぐに確認することができます。ユーザーインタフェースには、それがデータファイル毎のデータ解析メソッドか、またはシーケンスメソッドのいずれであるかの情報とともに、現在読み込まれているメソッドの名前が常に表示されます。
- マウスをメソッド名フィールドの上に移動すると、ツールチップに完全なパスとメソッドの名前が表示されます。
- ドロップダウンボックスは、[**プレファレンス**] ダイアログのメソッドオプションのショートカットを提供します。ここから任意のオプションを直接有効にすることができ、次回 [ナビゲーションテーブル] から分析を読み込む際にはそのオプションが適用されます。さらに、現在アクティブになっているオプションを確認するのにも非常に便利です。これらのオプションはデータレビューにのみ適用され、再解析には適用されないことに注意してください。

データ解析ビューにおけるメソッド保存

[**データ解析**] ビューの操作により、ユーザーはメソッドのデータ解析パラメータを最適化します。実際のワークフローでは、メソッドの保存に加えて、シーケンスメソッドを別名で保存したり、マスターメソッドとしてマスターメソッドディレクトリに保存したりすることも必要になる場合があります。

データ解析の [**メソッド**] メニューには、メソッド保存に使用するいくつかの項目があります。

表 2　データ解析ビュー［メソッド］メニューの保存オプション

メソッド読み込みプレファレンス	使用できる保存オプション
現在のメソッド	**メソッド保存**
	名前を付けてメソッド保存
シーケンスメソッド	**シーケンスメソッドを保存**
	新しいマスターメソッドとして保存
データファイル毎のメソッド	**データファイルメソッドを保存**
	新しいマスターメソッドとして保存

[**新しいマスターメソッドとして保存**] オプションには、シーケンスメソッドや、データ毎のメソッド DA.M はデフォルトのターゲットディレクトリとして事前に選択されたマスターメソッドディレクトリがあります。

マスターメソッドの更新機能

[**メソッド**] メニューには、個々のメソッドに対して開発したデータ解析パラメータのみを、シーケンスやマスターメソッドに適用できる機能があります。[**マスターメソッドを更新**] または [**シーケンスメソッドを更新**] オプションは、[**メソッド**] メニュー、または [**ナビゲーションテーブル**] の該当する分析を右クリックして選択することで利用できます。

この機能が使用できる状況は次のとおりです。

表 3　更新の有効性 ... メソッド機能

読み込んだメソッド	使用できるオプション
データファイル毎のメソッド (DA.M)	マスターメソッドを更新
	シーケンスメソッドを更新
シーケンスメソッド	マスターメソッドを更新
マスターメソッド	–

注記

この機能により、ターゲットメソッドのデータ解析パラメータのみが更新されます。すべてのデータ解析パラメータが上書きされるため注意が必要です。技術的な理由から、データ解析パラメータに加えて、ターゲットメソッドの監査証跡も更新に使用するメソッドの監査証跡で上書きされます。

データ解析： データの再解析

データレビューとは異なり、シーケンス再解析ではキャリブレーションテーブルの更新、シーケンステーブルのパラメータ変更、シーケンスへの新しいメソッド追加など、シーケンス内の分析すべてがシーケンスで指定したとおりに再解析されます。

新しいデータ編成コンセプトでは、データファイル、シーケンスファイルのコピー、取り込みで使用されるすべてのシーケンスメソッドなど、再解析に必要なすべてのファイルがシーケンスコンテナに含まれています。そのため、[ナビゲーションテーブル] にシーケンスを読み込むだけで、シーケンス再解析が可能となり、必要なツールセットが使用できます。

図 15　　シーケンス再解析のためのツールセット

再解析をする際には以下の規則に注意が必要です。

- [ナビゲーションテーブル] にシーケンスコンテナを読み込む際、ChemStation はこのコンテナにあるシーケンスファイル .S を自動的に読み込みます。このシーケンスファイルには、コンテナ内のデータファイルに関連するすべてのシーケンスラインが含まれます。
- すべてのアクションがシーケンスメソッドに対して実行されます。変更した解析パラメータを適用する場合は、シーケンスメソッドを変更する必要があります。
- **[プレファレンス]** ダイアログのメソッド読み込み設定は再解析には適用されません。常にシーケンスメソッドまたは更新されたシーケンスメソッドが使用されます。[プレファレンス] のメソッド読み込み機能はレビューのみに有効です。
- 再解析中、バッチ (*.b) ファイル、シーケンス / シングルランログ (*.log)、[ナビゲーションテーブル] が更新されます。再解析された各データのデータファイル毎のメソッド (DA.M) は、現在のシーケンスメソッドで上書きされます。

注記

シーケンスを再解析すると、すべてのアクションがシーケンスメソッドに対して実行されるため、各データファイルの DA.M が上書きされます (DA.M メソッドに保存したすべての変更が上書きされます)。データ解析における DA.M の最適化は、再解析が完了した後で、最後のデータ解析手順として行う必要があります。

- マスターメソッドディレクトリから新しいメソッドをシーケンステーブルに追加する場合、メソッドリストの [**参照 . . .**] 項目を使用して、メソッドディレクトリを指定して参照する必要があります (既にシーケンスコンテナに存在するメソッドのみが、参照なしに表示されます)。再解析中、新しいメソッドはシーケンスコンテナにコピーされます。よって、コンテナに既に存在するメソッドと同じ名前のメソッドを新しいメソッドとして選択することはできません。

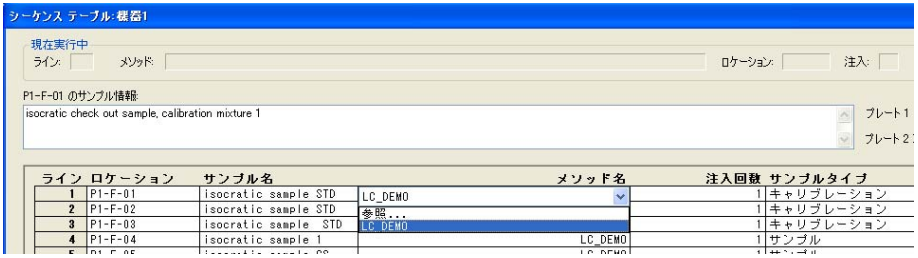

図 16　　シーケンステーブルのマスターメソッドディレクトリの参照

- シーケンステーブルでは、行の追加や削除はできません。
- [**シーケンスパラメータ**] ダイアログでは、オペレータ名、シーケンスコメント、シーケンス情報の使用オプションのみが変更できます。その他のフィールドはすべてデータ取り込み時に設定しておく必要があります。再解析では変更できません。

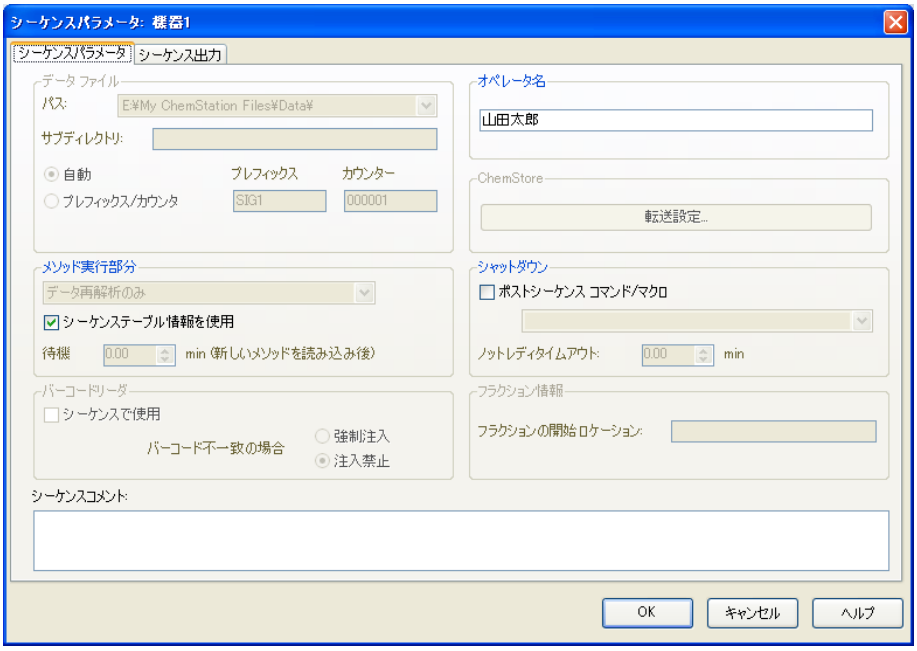

図 17　　データ解析のシーケンスパラメータ

データ解析ビューにおけるシーケンス保存

シーケンステーブル、シーケンスパラメータ、シーケンス出力パラメータの変更後に、[**シーケンス**] メニューからシーケンスを保存することができます。さらに、シーケンスコンテナに保存されているデータ解析のシーケンスをシーケンステンプレートとして保存することができます。取り込み中、シーケンステーブルにシーケンスラインを追加した場合、この機能が役に立ちます。追加されたラインは、特定のシーケンスコンテナでのみ使用することができますが、元のシーケンステンプレートにはありません。

このような場合にシーケンスを新しいシーケンステンプレートとして保存すると、すべてのフィールドが再編集できるよう、シーケンスファイルが自動的に変換されます。

4 [ユニークなフォルダ作成オフ] のワークフロー

ユニークなフォルダ作成のオン / オフどちらを選択 するか 38
[ユニークなフォルダ作成オフ] のワークフロー 40
シーケンスコンテナマイグレーション 44

この章では、ChemStation B.01.03 以前のリビジョンようにデータを保存する [ユニークなフォルダ作成オフ] の操作に関する情報を提供します。このモードでは、ChemStation の新しいデータレビューや再解析機能を十分に活用することはできません。

ユニークなフォルダ作成のオン / オフどちらを選択するか

前の章で述べてきたような新しいデータ編成のコンセプトには、以下のような多くの利点があります。

- シーケンスデータが上書きされません。シーケンスの取り込みごとに、結果データファイルを一意の名前で独自のシーケンスコンテナに保存します。
- シーケンスコンテナの概念では、データはシーケンスファイルのコピーとシーケンスで使用されるすべてのメソッドのコピーなどの、データ解析に必要な情報とともに保存されます。これらのメソッドは特定のシーケンス向けに入力や変更をすることができ、元のマスターメソッドに影響を及ぼさないようにすることが可能です。このようにして、コンテナの概念はシーケンスの定義を強化し、結果を作成するための一連のデータファイルとメソッドのセットとして取り扱います。
- データのレビューと再解析は、[**データ解析**] ビューの [ナビゲーションテーブル] から使用することができます。
- データコンテナの概念は、Agilent ChemStation OpenLAB オプションに対する最適な前提条件であり、これにより、**Agilent OpenLAB Enterprise Content Manager** (ECM) とのデータ交換が可能になっています。

しかしながら、使用するワークフローに従って作業をするには、ユーザーが ChemStation B.01.03 以前の形式のデータ保存を希望する状況が発生する場合があります。

- メソッドの開発中は、取り込みとデータ解析で同じ 1 つのメソッドを使用し、次の測定と取り込み済みのデータの再解析に同じ変更が自動的に適用されるようにしたほうが便利です。
- シーケンスの選択分析の場合など、複数の測定データを 1 つのフォルダに保存する必要が生じる場合があります。
- 旧リビジョンの ChemStation システム用に設計されたカスタムマクロを使用している場合、古いデータ構成方式に従ってデータ、メソッド、およびシーケンスを保存しなければならない可能性があります。

- ChemStation B.01.03 以前のリビジョンのシステムを使用しているラボにおいて ChemStation B.04.01 を使用する場合、すべてのシステムで同じデータ構成モードを使用するほうが便利である場合があります。

[ユニークなフォルダ作成オフ] のワークフロー

B.02.01 より前のリビジョンの ChemStation で使用されていたようなデータ保存方法を使用できるよう変更するには、[**プレファレンス**] ダイアログボックスの [**シーケンス**] タブにある [**データ保存**] セクションを使用します。ここで [**ユニークなフォルダ作成オン**] と [**ユニークなフォルダ作成オフ**] のいずれかを選択します (『40 ページ 図 18』)。デフォルトでは、[**ユニークなフォルダ作成オン**] が選択されています。[**ユニークなフォルダ作成オン**] を選択すると、1 ～ 3 章で述べたようなデータ保存コンセプトが有効になります。

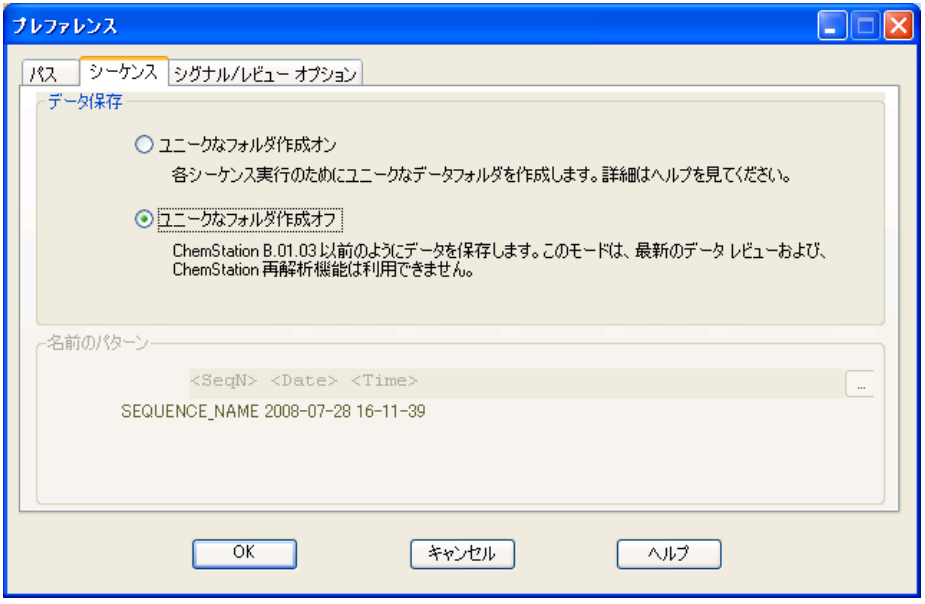

図 18　プレファレンスダイアログ / シーケンスタブ

注記

ユニークなフォルダ作成のオン / オフ切り替えは、設定後の測定にのみ適用されますが、既に取り込んだデータのデータ構成は変更されません。

[ユニークなフォルダ作成オフ] のワークフロー

注記

作業開始時に 2 つのモードのいずれかに決定し、以後は切り替えないことを推奨します。

ChemStation OpenLAB オプションや、ChemStore、セキュリティパックがインストールされたシステムにおいては、ユニークなフォルダ作成をオフに切り替えることはできません。

[**ユニークなフォルダ作成オフ**] を選択すると、データ保存は以下のようになります。

- シーケンスデータはシーケンスコンテナではなく、[**シーケンスパラメータ**] で指定されているサブディレクトリに直接取り込まれます (『14 ページ 図 4』)。そのため、[**プレファレンス**] ダイアログの [**シーケンス**] タブにあるシーケンスの [名前のパターン] は淡色表示になります (『40 ページ 図 18』)。
- 2 つ以上のシーケンスの取り込みで、同じサブディレクトリにデータが取り込まれる可能性があります。このことは、既存データが上書きされるというリスクを意味しますが、一方でシーケンスの選択分析を使用してシーケンスを分割して実行した際に、1 つのフォルダへ結果を保存できることを意味します (これは、ユニークなフォルダ作成がオンの場合は不可能)。
- シーケンスメソッド (.M) またはシーケンスファイルのコピー (.S) はデータとともに保存されず、シーケンスログファイルとバッチファイル (.B) のみが保存されます。つまり、[**プレファレンス**] ダイアログで指定したパスにあるメソッドとシーケンス (『12 ページ 図 2』) のみ使用することができます。これらのファイルは、取り込みだけではなく、データのレビューや再解析の際にも使用されます。シーケンスまたはデータファイル固有の変更をメソッドに保存したい場合は、異なる名前でメソッドを保存するしかありません。あるいは、そのような変更を取り込みメソッドにも適用するしかありません。一方で、メソッドの開発中はこのような動作が望ましい場合があります。
- データファイルに固有のメソッド ACQ.M および DA.M は保存されません。元の取り込みに関する情報は、レポートに含めておくか、メソッドのランタイムチェックリストで [**データファイルにメソッドを保存**] を選択しておくことでのみ保存できます (『42 ページ 図 19』)。このオプションを使用すると、取り込みメソッドは各データファイルに RUM.M として保存されます。

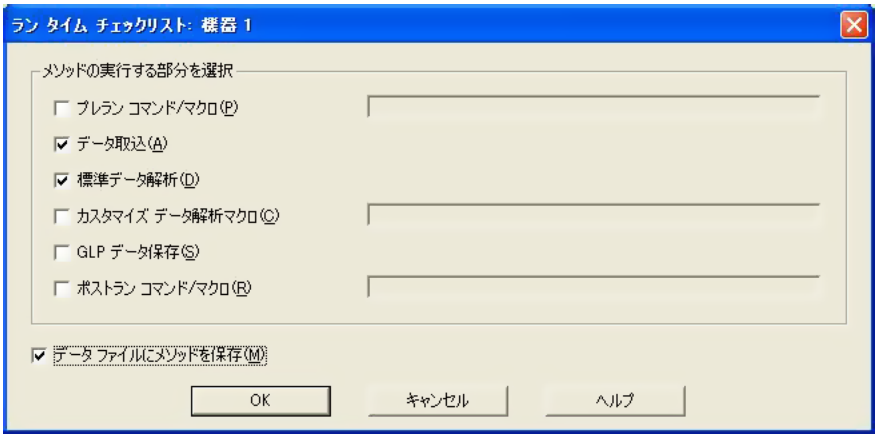

図 19　ランタイムチェックリスト : データファイルにメソッドを保存

ChemStation B.02.01 から導入されている ChemStation の拡張ユーザーインタフェースは、ユニークなフォルダ作成がオフの場合にも使用できます。ただし、このモードでは利用できない機能があります。ChemStation B.02.01 より前のリビジョンで取り込まれた分析にも、同じ制限が適用されます。

- シーケンスが [ナビゲーションテーブル] に読み込まれると、再解析ツールセットが淡色表示になります (『42 ページ 図 20』)。このデータ保存モードで取り込まれたシーケンスの再解析は、シーケンスパラメータで **[データ再解析のみ]** オプションを使用し、**[メソッド & ランコントロール]** ビューからのみ実行することができます (『43 ページ 図 21』)。

図 20　ユニークなフォルダ作成がオフの設定で取り込まれたシーケンスの [ナビゲーションテーブル]

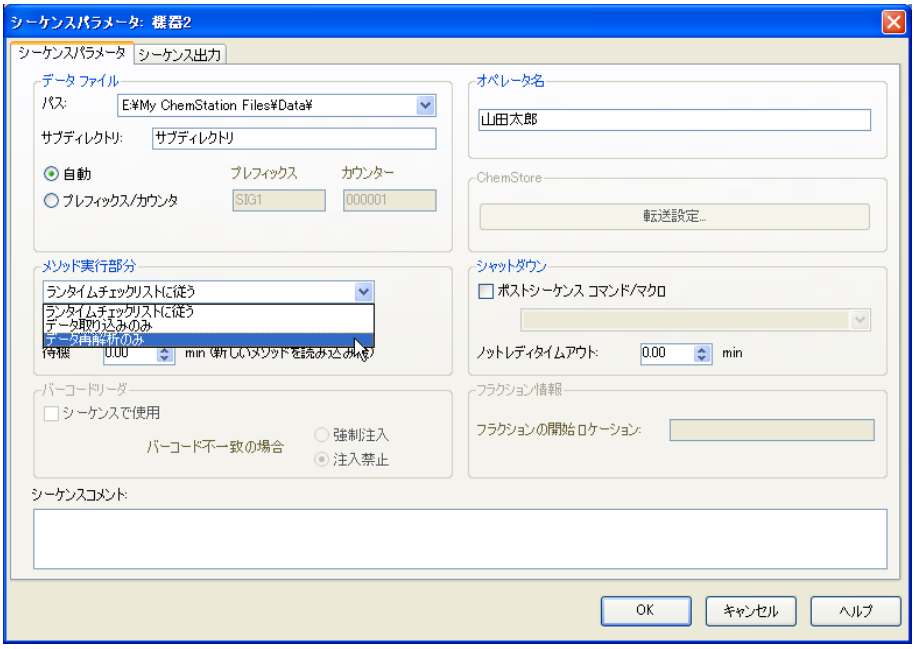

図 21　ユニークなフォルダ作成がオフの設定で取り込まれたシーケンスデータの再解析

- メソッド読み込みオプションで [**データファイル毎のメソッド (DA.M)**] または [**シーケンスメソッド**] (『23 ページ 図 10』を参照) を設定していると、[ナビゲーションテーブル] で分析が切り替わるたびに、データファイル毎のメソッド / シーケンスメソッドが存在しないという警告メッセージが表示されます。前述したように、これらのメソッドはデータといっしょに保存されていません。このモードの場合、データレビューには [**現在のメソッドを使用**] が最も適切な設定です。

シーケンスコンテナマイグレーション

ChemStation では、非コンテナデータをシーケンスコンテナ形式に移行するツールがあります。この操作を正常に実行するためには、元のシーケンスファイルが必要です。シーケンスファイルには、シーケンスのすべてのデータファイルが再解析できるよう、必要なすべてのシーケンスラインがあり、元のデータファイルの命名規則に従っている必要があります。さらに、シーケンステーブルの [メソッド] 列にあるすべてのメソッドが必要です。

以下の手順に従いマイグレーションを実行します。

[**データ解析**] ビューの [**シーケンス**] メニューから、[**シーケンスコンテナ マイグレーション**] をクリックします。

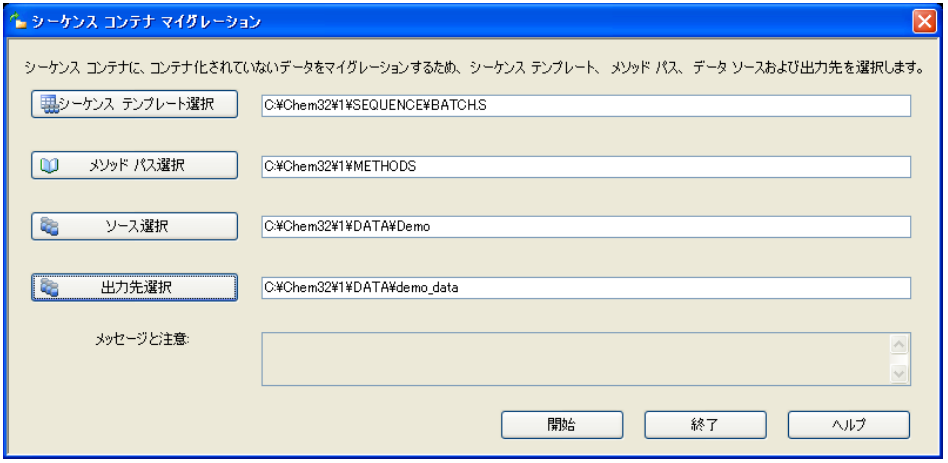

図 22　　シーケンスコンテナマイグレーション

次の必須フィールドに入力します (『44 ページ 図 22』を参照)。

[**シーケンステンプレート選択**]: 移行するデータセットと一致するシーケンステーブルを持つシーケンスファイル .S を選択します。

[**メソッドパス選択**]: シーケンステーブルで参照しているメソッドのディレクトリを選択します。

[**ソース選択**]: 移行するデータファイルのディレクトリを選択します。

[**出力先選択**]: 作成するシーケンスコンテナのパスとフォルダ名を指定します。既存フォルダを選択するか、新しいフォルダを作成することができます。

すべてのフィールドへの入力が完了したら、マイグレーションを開始できます。

以下のステップが実行されます。

- シーケンスコンテナディレクトリが作成されます。
- シーケンステンプレートがコンテナにコピーされます。このテンプレートは、[**データ解析**] ビューにおいて、データファイルの再解析ができる状態に変換されます。
- シーケンステーブル内で参照しているメソッドが、指定したパスからコンテナフォルダへコピーされます。
- データファイル、シーケンスログブック、およびバッチファイルが、データのソースディレクトリから出力先ディレクトリにコピーされます。
- シーケンステーブル内の情報に従って、対応するメソッドのコピーがデータファイルごとに DA.M としてコピーされます。

コンテナのマイグレーションが完了すると、完了のメッセージが [**メッセージと注意**] フィールドに表示されます。完了しなかった場合は、マイグレーション中の問題を示す警告メッセージが表示されます。警告メッセージをダブルクリックすると、警告に関する詳細が表示されます。

www.agilent.com

本書では

ChemStation のリビジョン B.02.01 以降では、結果データを速く確認できるようにデータの確認と再解析の機能が大幅に改善されました。

ChemStation の新しいデータ保存機能は、シーケンスデータとメソッドを効率的に体系化するのに役立ちます。

© Agilent Technologies 2006, 2007-2010

Printed in Germany
2/2010

G2170-96044

Agilent Technologies